

Universidade Estadual de Campinas

Departamento de Estatística — IMECC

Disciplina: MI404 – Métodos Estatísticos

Professor: Dr. Ronaldo Dias

Acadêmicos: André Felipe Berdusco Menezes (RA:229296)

Leonardo Uchôa Pedreira (RA:156231)

Josué dos Santos da Conceição (RA:227932)

Metodologia de Superfície de Resposta

Campinas

Junho de 2019

Resumo

Neste trabalho discutimos sob o ponto de vista teórico e ilustramos com uma análise de dados reais a metodologia de superfície de resposta. Os métodos estudados são bastante utilizados em situações experimentais cujo interesse é determinar a região experimental ótima, isto é, obter a máxima, ou mínima, resposta segundo alguns fatores. Os modelos estatísticos utilizados são definidos e suas características são discutidas. Além disso, apresentamos uma discussão teórica das técnicas utilizadas para caracterização da superfície de resposta estimada e métodos de se obter as direções ótimas.

Palavras-chave: superfície de resposta, *steepest ascent*, análise canônica, análise *ridge*.

Sumário

1	Introdução	1
2	Desenvolvimento da Metodologia	1
2.1	Modelos de Superfície de Resposta de Primeira Ordem	1
2.1.1	Delineamentos Experimentais de Primeira Ordem	2
2.1.2	<i>Steepest Ascent</i>	3
2.2	Modelos de Superfície de Resposta de Segunda Ordem	4
2.2.1	Delineamentos Experimentais de Segunda Ordem	4
2.2.2	Análise Canônica	6
2.2.3	Análise <i>Ridge</i>	8
3	Exemplos e Aplicações	9
	Referências	11
	Apêndice	12

1 Introdução

É muito comum em estudos experimentais o interesse em obter a melhor combinação de fatores no sentido de fornecer o maior (ou menor) valor da variável resposta. Nesta ocasião, apesar de tal arranjo existir no conjunto de condições exploradas no experimento, muitas vezes é possível obter outra combinação ainda melhor e que não foi contemplada no experimento. Assim, é preciso realizar novos experimentos em outras condições experimentais de forma a buscar uma direção que nos guie a tal combinação. Mas como escolhemos as novas combinações de fatores?

Primeiramente, é importante citar que a escolha dos fatores que compõem o delineamento é uma simplificação da realidade e que a combinação ótima pode estar longe da nossa escolha. Se a verdadeira relação entre os fatores escolhidos \mathbf{x} e a variável resposta \mathbf{y} é descrita pela função f , então podemos supor que $\mathbf{y} = f(\mathbf{x}) + \varepsilon$, sendo que ε representa outras fontes de variabilidade que não podem ser explicadas por f . Mas quem é a função f ? Apesar de não sabermos, podemos obter uma aproximação dela. Para isso, uma vez que novos experimentos serão realizados desejamos que eles sejam o menos complexos, talvez seja necessário realizar vários. Para este cenário delineamentos fatoriais são os mais eficientes e induzem modelos polinomiais de grau um. Desta forma, a função f pode ser aproximada por um polinômio.

Tendo em vista o panorama apresentado a metodologia de superfície de resposta introduzida formalmente por Box e Wilson (1951) tem sido aplicada com sucesso em situações cujo interesse é determinar a região experimental que otimiza a variável resposta. Conforme discutem vários autores, por exemplo Myers, Montgomery e Anderson-Cook (2009) e Dean, Voss e Draguljić (2017), a metodologia de superfície de resposta faz uso da experimentação sequencial para caminhar em direção à melhor combinação dos fatores.

Nas seções que seguem apresentamos os modelos de superfície de resposta de primeira e segunda ordem e discutimos os delineamentos experimentais apropriados para cada modelo. Além disso, apresentamos uma discussão teórica das técnicas utilizadas para caracterização da superfície de resposta estimada e métodos de se obter as direções ótimas. Por fim, apresentamos um exemplo de aplicação da metodologia com resoluções e comentários.

2 Desenvolvimento da Metodologia

2.1 Modelos de Superfície de Resposta de Primeira Ordem

De forma geral, o experimentador está interessado em estudar algum fenômeno (processo, produto ou sistema) em que existe uma variável resposta Y que depende de outras

variáveis controláveis x_1, \dots, x_p . Esta relação é expressa por

$$Y = f(x_1, \dots, x_p) + \varepsilon \quad (1)$$

em que a verdadeira função f é usualmente desconhecida e ε é denominado de erro aleatório, isto é, representa outras fontes de variabilidade que não podem ser explicadas por f . Além disso, assume-se que ε tem distribuição Normal com média zero e variância comum σ^2 .

Na maior parte das situações não é conhecida a verdadeira relação entre a variável dependente e as demais variáveis. Assim, busca-se uma aproximação da verdadeira relação, que permita avaliar o quão afastados estamos da região ótima. Esta aproximação é obtida por meio da expansão de Taylor da função $f(x_1, \dots, x_p)$. Considerando uma expansão de primeira ordem têm-se o modelo de superfície de resposta de primeira ordem, definido por

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p + \varepsilon \quad (2)$$

em que β_0 é o intercepto e β_i é o parâmetro que representa o efeito linear do i -ésimo fator, para $i = 1, \dots, p$.

Um recurso bastante utilizado na metodologia de superfície de resposta é a codificação dos fatores. Esse procedimento remove as unidades de medida das variáveis e permite que os níveis dos diferentes fatores sejam comparáveis. Assim, a codificação dos níveis de cada fator é realizada de tal forma que o valor zero representa o intervalo médio do nível do fator e $+1$ e -1 representam o maior e o menor nível do fator, respectivamente. A codificação do i -ésimo fator é obtida por

$$z_i = \frac{x_i - m_i}{h_i} \quad (3)$$

em que m_i denota a média entre o maior e menor valor observado do fator x_i e h_i é metade da diferença entre o maior e o menor valor observado do fator x_i .

O modelo (2) definido com os fatores codificados pode ser escrito por

$$Y = \gamma_0 + \gamma_1 z_1 + \dots + \gamma_p z_p + \varepsilon. \quad (4)$$

Evidentemente, ajustar um modelo com os fatores codificados não produzirá os mesmos coeficientes estimados. Para obter recíproca desta transformação, basta substituir cada z_1, \dots, z_p do modelo ajustado com variáveis codificadas pelo lado direito da Equação (3).

2.1.1 Delineamentos Experimentais de Primeira Ordem

Para o ajuste do modelo de primeiro ordem o delineamento experimental empregado deve possuir as seguintes características: (i) permitir a eficiente estimação de cada

efeito linear; (i) permitir um teste para falta de ajuste do modelo de primeira ordem; (i) ser expansível a um bom modelo de segunda ordem.

Consideremos \mathbf{D} , a matriz do delineamento de primeira ordem, cujas colunas são os valores dos fatores codificados. Quando $\mathbf{D}^\top \mathbf{D}$ é uma matriz diagonal, temos um delineamento ortogonal. Delineamentos ortogonais permitem que o efeito de cada fator $\gamma_1, \dots, \gamma_p$ sejam interpretados de forma independente.

Segundo Khuri e Cornell (1987) os principais delineamentos de primeira ordem ortogonais são: delineamentos fatoriais 2^p , delineamentos fatoriais fracionados 2^p , delineamentos Plackett-Burmann. Este último são delineamentos fatoriais fracionais do tipo 2^p , com $p+1$ pontos (observações). Utilizam para p somente múltiplos de 4.

Com a coleta dos dados, a estimação do modelo induzido pelo delineamento experimental empregado é realizada pelo método de mínimos quadrados e técnicas da análise de regressão são utilizadas para avaliar a qualidade do ajuste e as suposições. Além disso, um teste estatístico importante e frequentemente empregado é o teste de falta de ajuste, que auxilia a verificar se a forma funcional do modelo é adequada (DEAN; VOSS; DRAGULJIĆ, 2017). Outra forma de verificar a adequabilidade do modelo de primeira ordem, é testar o efeito da curvatura quadrática pura (MONTGOMERY, 2006). Este teste é importante para detectar curvatura quando se aproxima das condições ótimas do experimento, isto é, quando a superfície já não é mais um plano.

A soma de quadrados de cada fator, que para fatores com 2 níveis terá 1 grau de liberdade, poderá ser calculada, tal como os quadrados médios de cada fator e a soma de quadrados total. As somas obtidas anteriormente para a falta de ajuste e a curvatura quadrática pura poderão ser reunidas com as demais somas de quadrados na Análise de Variância para o modelo de primeira ordem, que além dos testes mencionados anteriormente, poderá também testar a significância de cada fator.

2.1.2 *Steepest Ascent*

Tendo em vista que a metodologia de superfície de resposta é um método sequencial e que busca a otimização, em muitos casos apenas o ajuste de um modelo de primeira ordem não é suficiente para alcançar a otimização desejada. Isto acontece porque quando um modelo está distante da região considerada ótima, modelos de primeira ordem geralmente são boas aproximações para verdadeira superfície de resposta. No entanto, quando um modelo se aproxima do ótimo, geralmente é necessário que este modelo apresente curvatura para representar adequadamente a superfície. Testes para falta de ajuste e efeito da curvatura quadrática podem ser utilizados para verificar se o modelo não representa adequadamente a resposta média e se existe curvatura significativa presente no modelo, indicando que a superfície não pode mais ser representada por um plano. Um modelo de ordem superior deverá então ser ajustado para modelar o experimento.

O método *Steepest Ascent* procura a forma mais eficiente de alcançar a superfície de

resposta que seja capaz de conter o aumento (ou decréscimo) desejado na resposta. Os passos ao longo do caminho são proporcionais aos coeficientes de regressão estimados $\hat{\gamma}_i$'s. Para aumentar a resposta, aumentamos o valor do fator z_i se seu coeficiente estimado $\hat{\gamma}_i$ for positivo e diminuir z_i se $\hat{\gamma}_i$ for negativo. Para diminuir a resposta, podemos proceder de forma oposta: diminuir z_i se $\hat{\gamma}_i$ for positivo e aumentar z_i se $\hat{\gamma}_i$ for negativo (DEAN; VOSS; DRAGULJIĆ, 2017). Quando o aumento ou diminuição na resposta não for mais observado, devemos ajustar outro modelo na região experimental que se observou a mudança de comportamento e continuar a subida/descida. Quando chegarmos próximo à região ótima, testes de falta de ajuste e de curvatura quadrática indicarão que um modelo de primeira ordem não é mais adequado, indicando a necessidade de ajuste de um modelo de segunda ordem.

2.2 Modelos de Superfície de Resposta de Segunda Ordem

Devido sua simplicidade é comum o modelo de primeira ordem apresentar problemas de falta de ajuste, principalmente quando a superfície apresenta alguma forte curvatura. Nestes casos, a fim de incorporar tal curvatura o próximo modelo polinomial mais simples que pode ser empregado é o modelo de segunda ordem

No modelo de segunda ordem aproxima-se a função $f(x_1, \dots, x_p)$ utilizando expansão de Taylor de segunda ordem. Dessa forma, o modelo definido em (1) passa a ser escrito da seguinte forma

$$Y = \gamma_0 + \sum_{i=1}^p \gamma_i z_i + \sum_{i=1}^p \gamma_{ii} z_i^2 + \sum_{i < j} \gamma_{ij} z_i z_j + \varepsilon \quad (5)$$

em que γ_i representa o efeito linear do i -ésimo fator codificado, γ_{ii} representa o efeito quadrático do i -ésimo fator codificado e γ_{ij} indica o efeito de interação entre o i -ésimo e o j -ésimo fatores codificados.

Assim como no modelo de primeira ordem a estimação dos parâmetros associados ao modelo (5) é realizada utilizando o método dos mínimos quadrados, uma vez que o modelo é um caso particular do modelo linear geral.

2.2.1 Delineamentos Experimentais de Segunda Ordem

Uma etapa crucial e talvez a principal no estudo de superfície de resposta, é o delineamento utilizado para coleta dos dados. Se o experimentador está interessado em utilizar o modelo de segunda ordem para estudar a superfície de resposta, então conforme aponta Dean, Voss e Draguljić (2017) o delineamento empregado deve permitir (i) uma estimação precisa da superfície de resposta, no sentido de que $\text{Var}(\hat{Y})$ seja pequena na região experimental; (ii) realização do teste para falta de ajuste do modelo de segunda ordem; (iii) uma estimação eficiente dos parâmetros do modelo.

Portanto, o experimento é conduzido de forma a obter o melhor ajuste para o modelo de segunda ordem. Observe que o modelo (5) contém $1 + 2p + p(p-1)/2$ parâmetros, logo a condição mínima para o ajuste do modelo é uma observação em cada nível dos fatores $z_i, i = 1, \dots, p$.

Introduzido por Box e Wilson (1951) o Delineamento Composto Central (DCC), em inglês *Central Composite Design*, é seguramente o delineamento mais utilizado para ajustar modelos de segunda ordem. Esse tipo de delineamento é consequência natural de experimentos sequenciais que iniciam com delineamentos 2^p fatorial ou fatorial fracionado. Isto é, após observar a presença de uma curvatura o experimentador acrescenta pontos centrais e axiais que permitem a captura da curvatura por meio de modelos de segunda ordem e então é possível detalhar a região experimental ótima.

A Figura 1 ilustra o DCC para o caso de $p = 2$ fatores no experimento e diferentes distâncias (α) entre os pontos axiais e o ponto central. Percebe-se que o DCC é uma extensão do 2^p fatorial incluindo um ponto central e quatro pontos axiais (também conhecidos como pontos de estrela) que estão representados pelo símbolo “o”. Quando $\alpha = 1$ os pontos axiais são as médias entre os níveis dos fatores. Por outro lado, para valores de $\alpha > 1$ os pontos axiais ficam além da região experimental definidas pelos níveis do fatorial 2^p . A principal vantagem de fixar $\alpha > 1$ é a possibilidade de testar efeitos de curvatura cúbico e quadrático.

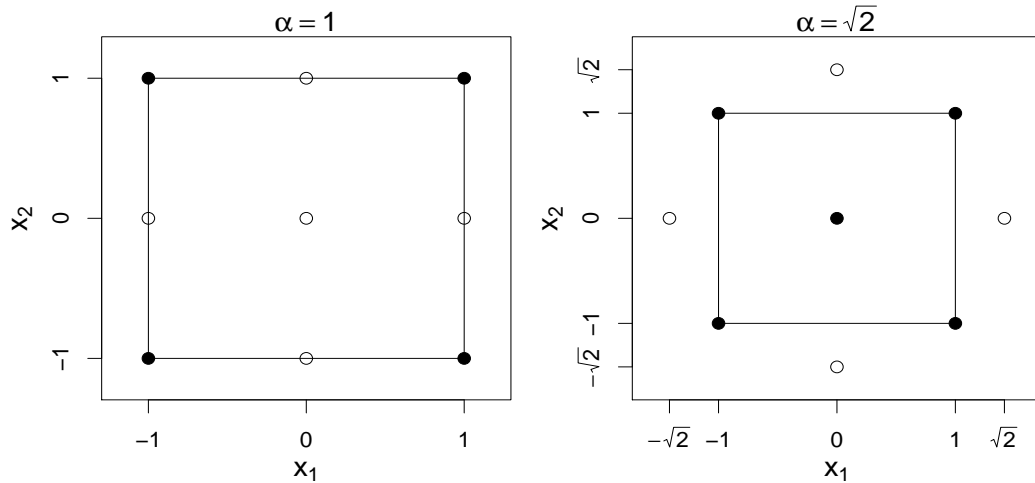


Figura 1: Representação do Delineamento Composto Central para $p = 2$ e diferentes valores de α .

Para melhor compreensão destacamos os principais componentes do Delineamento Composto Central:

- **Pontos de vértice:** utilizados para estimação dos efeitos lineares e os efeitos de interação dois a dois. Em geral, esses pontos são estudados previamente em um experimento fatorial 2^p . Os pontos de vértice são representados pelos níveis dos fatores $(\pm 1, \dots, \pm 1)$.

- **Pontos centrais:** fornecem condições para estimação do erro puro e contribuem para realização do teste da falta de ajuste. Os pontos centrais são representados pelas coordenadas $(0, \dots, 0)$.
- **Pontos axiais:** estão localizados a uma distância α do ponto central e são fundamentais para a estimação dos efeitos quadráticos. No caso de um experimento com p fatores existem $2p$ pontos axiais. São representados pelos níveis dos fatores $(\pm\alpha, 0, \dots, 0), (0, \pm\alpha, \dots, 0), \dots$

Dessa forma, verificamos que o delineamento composto central requer a escolha prévia do valor de α . Conforme discute Dean, Voss e Draguljić (2017) a escolha de α depende das propriedades desejáveis do delineamento e do objetivo do experimentador.

Uma propriedade que pode ser de interesse do experimentador é a rotabilidade. Dizemos que um delineamento é rotável se a variância $\text{Var}(\hat{Y})$ da resposta predita é a mesma para todos níveis dos fatores $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_p)$ que estão a uma distância $d = \left(\sum_i z_i^2\right)^{1/2}$ do ponto central $\mathbf{z}_0 = (0, \dots, 0)$. Portanto, têm-se a mesma quantidade de informação sobre a superfície de resposta na mesma distância d independente da direção em relação ao centro. Segundo Dean, Voss e Draguljić (2017) essa é uma propriedade razoável, uma vez que ao coletar os dados não sabemos em que direção do centro do experimento o ponto estacionário esta localizado.

De acordo com Draper (1982) o DCC é rotável se $\alpha = (n_f)^{1/4}$, em que n_f é o número de pontos de vértice, ou seja, total de observações coletadas no delineamento fatorial.

Outra propriedade interessante é a ortogonalidade. Dizemos que um delineamento é ortogonal se as somas de quadrados dos termos lineares, de interação e quadrático ajustada pelo intercepto são independentes. Esta propriedade é bastante útil se o pesquisador tem interesse em avaliar quais efeitos são significativamente diferentes de zero. Khuri e Cornell (1987) mostram que o DCC é ortogonal se $(n_f + 2\alpha^2)^2 = n_f n$, em que $n = n_f + 2p + n_0$ é o total de observações. Note que a ortogonalidade do DCC pode ser determinada especificando o número de pontos centrais n_0 ou valor de α . Por exemplo, para n_0 fixo o DCC é ortogonal se $\alpha = \left(\frac{\sqrt{n_f n} - n_f}{2}\right)^{1/2}$.

2.2.2 Análise Canônica

O principal objetivo da metodologia de superfície de resposta é investigar o comportamento do modelo ajustado e identificar a região ótima da variável resposta. Em outras palavras, após o ajuste e avaliação da qualidade do ajuste do modelo de segunda ordem, o experimentador tem interesse em (i) localizar o ponto estacionário e (ii) caracterizar a natureza do ponto estacionário como sendo um ponto de mínimo, máximo ou sela da superfície de resposta ajustada. Nesse sentido, surge a análise canônica, um método

matemático utilizado para localizar e caracterizar o ponto estacionário. Vale mencionar também que o uso de gráficos de contorno e/ou superfícies é uma ferramenta bastante útil para visualização do ponto estacionário.

Considere o modelo ajustado de segunda ordem com os fatores codificados, definido por

$$\hat{y} = \hat{\gamma}_0 + \sum_{i=1}^p \hat{\gamma}_i z_i + \sum_{i=1}^p \hat{\gamma}_{ii} z_i^2 + \sum_{i < j} \hat{\gamma}_{ij} z_i z_j. \quad (6)$$

O modelo (6) pode ser escrito em termos matriciais da seguinte forma

$$\hat{y} = \hat{\gamma}_0 + \mathbf{z}^\top \mathbf{b} + \mathbf{z}^\top \mathbf{B} \mathbf{z} \quad (7)$$

em que $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_p)$ é o vetor de variáveis explicativas, $\hat{\gamma}_0$ é a estimativa do intercepto, $\mathbf{b}^\top = (\hat{\gamma}_1, \dots, \hat{\gamma}_p)$ é o vetor com as estimativas dos parâmetros de efeitos lineares e \mathbf{B} é uma matriz simétrica de dimensão $p \times p$ com as estimativas dos efeitos quadráticos e interações, definida por

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \hat{\gamma}_{11} & \hat{\gamma}_{12}/2 & \cdots & \hat{\gamma}_{1k}/2 \\ & \hat{\gamma}_{22} & \cdots & \hat{\gamma}_{2k}/2 \\ & & \ddots & \vdots \\ Sym. & & & \hat{\gamma}_{kk} \end{bmatrix}.$$

Derivando o modelo ajustado (7) em relação a \mathbf{z} obtemos

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial \mathbf{z}} = \mathbf{b} + 2\mathbf{B}\mathbf{z}. \quad (8)$$

Igualando a Equação (8) ao vetor $\mathbf{0}$ e resolvendo para \mathbf{z} obtemos o ponto estacionário, que pode ser expresso por

$$\mathbf{z}_s = -\frac{1}{2}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{b}. \quad (9)$$

Dessa forma, substituindo (9) em (7) obtemos a variável resposta predita no ponto estacionário

$$\hat{y}_s = \hat{\gamma}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{z}_s^\top \mathbf{b}. \quad (10)$$

A natureza do ponto estacionário é determinada utilizando a forma canônica do modelo ajustado (7). Segundo Myers, Montgomery e Anderson-Cook (2009) o modelo ajustado na forma canônica é obtido fazendo duas transformações, uma de translação e a outra de rotação de eixos. Em resumo, seguimos as seguintes etapas:

- (i) Transladar a origem do sistema para o ponto estacionário. Para isso, fazemos $\mathbf{v} = \mathbf{z} - \mathbf{z}_s$ tal que $v_i = z_i - z_{si}$ para $i = 1, \dots, p$. Assim, o ponto estacionário é dado por $\mathbf{v}_s = (0, \dots, 0)$. Isso elimina todos termos lineares do modelo.

- (ii) Rotacionar os eixos do sistema de forma a eliminar os termos quadráticos e de interação. Para isso, fazemos $\mathbf{w} = \mathbf{P}^\top \mathbf{v}$, em que \mathbf{P} é a matriz cujas colunas são os autovetores normalizados da decomposição espectral da matriz \mathbf{B} .

Dessa forma, o modelo na forma canônica é definido por

$$\hat{y} = \hat{y}_s + \mathbf{w}^\top \mathbf{\Lambda} \mathbf{w} = \hat{y}_s + \sum_{i=1}^p \lambda_i w_i^2 \quad (11)$$

em que $\mathbf{\Lambda}$ é uma matriz diagonal com os autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ de \mathbf{B} .

Os sinais dos autovalores λ 's determinam a natureza do ponto estacionário e seus magnitudes relativas ajudam a entender o comportamento da superfície de resposta ajustada. Portanto temos os seguintes casos: se todos autovalores λ 's são negativos então o ponto estacionário é ponto de máximo; se são positivos, o ponto é mínimo; se há ao menos um que não concorde com os outros em sinal, então o ponto é de sela (MYERS; MONTGOMERY; ANDERSON-COOK, 2009).

2.2.3 Análise *Ridge*

Usualmente o experimentalista pode se deparar com situações onde o ponto estacionário não existe. Ou seja, o ponto estacionário pode ser um ponto de sela ou pode estar fora da região experimental. Nestes casos, para determinar a natureza do processo dentro e no perímetro da região experimental, o pesquisador pode otimizar a superfície ajustada sujeita alguma restrição. De fato, conforme explicam Myers, Montgomery e Anderson-Cook (2009) a análise *ridge* fornece um conjunto de pontos (\mathbf{z}_p) onde a resposta predita é ótima com a restrição de que tais pontos residem sobre uma esfera de raio R^2 .

Dessa forma, maximizamos o modelo ajustado (7) sujeito a restrição $\mathbf{z}^\top \mathbf{z} = R^2$. Utilizando multiplicadores de Lagrange chegamos a equação

$$(\mathbf{B} - \mu \mathbf{I})\mathbf{z} = -\frac{1}{2}\mathbf{b} \quad (12)$$

em que μ é o multiplicador de Lagrange.

Dessa forma para um valor fixo de μ resolvendo a equação (12) para \mathbf{z} obtemos um ponto estacionário em $R = (\mathbf{z}^\top \mathbf{z})^{1/2}$. Escolhas apropriadas de μ depende dos autovalores de \mathbf{B} . Myers, Montgomery e Anderson-Cook (2009) indicam as seguintes regras para determinar os valores de μ : se μ exceder o maior autovalor de \mathbf{B} então a solução para \mathbf{z} fornece o máximo de \hat{y} em $R = (\mathbf{z}^\top \mathbf{z})^{1/2}$, ao passo que se μ for inferior ao menor autovalor de \mathbf{B} então a solução para \mathbf{z} fornece o mínimo de \hat{y} em $R = (\mathbf{z}^\top \mathbf{z})^{1/2}$.

3 Exemplos e Aplicações

Como aplicação da metodologia estudada, fez-se a resolução do exercício 11.7 do livro de Box e Draper (2007). Este exercício fornece os dados relativos ao experimento do artigo de Cragle et al. (1955) e pede que se ajuste um modelo de segunda ordem, faça a redução da superfície final à sua forma canônica e forneça conclusões em relação as condições ótimas do experimento. Para a análise utilizamos a biblioteca **rsm** (LENTH, 2009) do software R na versão 3.6.

O experimento envolve um procedimento para armazenamento de sêmen bovino e o objetivo é compreender sua eficácia. Neste procedimento as três condições a serem exploradas são adições da porcentagem de citrato de sódio (x_1), porcentagem de glicerol (x_2) e o tempo de equilíbrio (x_3) em horas antes do congelamento com temperatura mantida a 5°C. A variável resposta é porcentagem de espermatozoides móveis sobreviventes, calculada como

$$y = \frac{\% \text{ de espermatozoides móveis após 5 dias a } -79^\circ\text{C}}{\% \text{ de espermatozoides móveis na hora da coleta}} \cdot 100$$

O delineamento experimental utilizado foi o Delineamento Composto Central 2^3 com um ponto central e ponto axial $\alpha = 2$ sem replicações, de forma que a coleta dos pontos centrais e axiais ocorreram junto com a coleta dos dados fatoriais. Comandos para gerar o desenho empregado no estudo estão disponíveis no Apêndice C - Códigos.

Como não ocorreram duas fases de coleta, não há a necessidade de incluir o efeito de blocos e o modelo utilizado é (5). Pela Tabela 1, pode-se perceber que somente os efeitos quadráticos associados às variáveis x_1 e x_2 são importantes. A estatística de erro puro é 0 tudo a partição da SSE é devido a falta de ajuste, o que é um sério indicativo de que a forma funcional está errada. Além disso, as razões $\gamma_3/\sigma(\gamma_3)$, $\gamma_{13}/\sigma(\gamma_{13})$, $\gamma_{23}/\sigma(\gamma_{23})$ e $\gamma_{33}/\sigma(\gamma_{33})$, (onde $\sigma(\gamma_{ij})$ é o desvio padrão da estimativa γ_{ij}) são bem menores do que os outros termos. Este é um indicativo de que a variável x_3 tenha uma influência negativa no modelo e portanto, vale a pena testar sua exclusão do modelo.

Ao se realizar testes de somas extras de quadrados (ver, por exemplo, Box e Draper (2007)), nota-se que a exclusão da variável x_3 do modelo é apoiada pelos dados. Ao reajustar o modelo de segunda ordem, agora com x_1 e x_2 , nota-se (uma não tão alta) significância dos termos quadráticos e de possivelmente interação (apesar da estatística de falta de ajuste, mostrada na Tabela 5, indicar rejeição do modelo reduzido) que é apoiada pela análise residual apresentada nos gráficos 1 e 2. A remoção desta interação, entretanto, não é apoiada pela soma extra de quadrados (ver Tabela 6) sendo o modelo final expresso por

$$\hat{y} = 57.769 - 1.312z_1 - 2.312z_2 + 9.125z_1z_2 - 9.048z_{11} - 11.423z_{22}$$

O modelo final na forma canônica fica escrito como

$$\hat{y} = 58.06 - 5.520w_1^2 - 14.948w_2^2$$

em que $w_1 = -0.791(z_1 + 0.155) - 0.612(z_2 + 0.163)$ e $w_2 = -0.612(z_1 + 0.155) + 0.791(z_2 + 0.163)$. Notemos que os dois autovalores obtidos são negativos, o que nos diz que estamos de fato no ponto de máximo, sendo ele $(z_1, z_2) = (-0.155, -0.163)$ ou $(x_1, x_2) = (2.891, 7.511)$. Direções adicionais em passos de 0.5 unidades para futuras investigações (no eixo) canônico estão no Apêndice B - Direções. Uma representação gráfica da superfície de resposta estimada é apresentada na Figura 2.

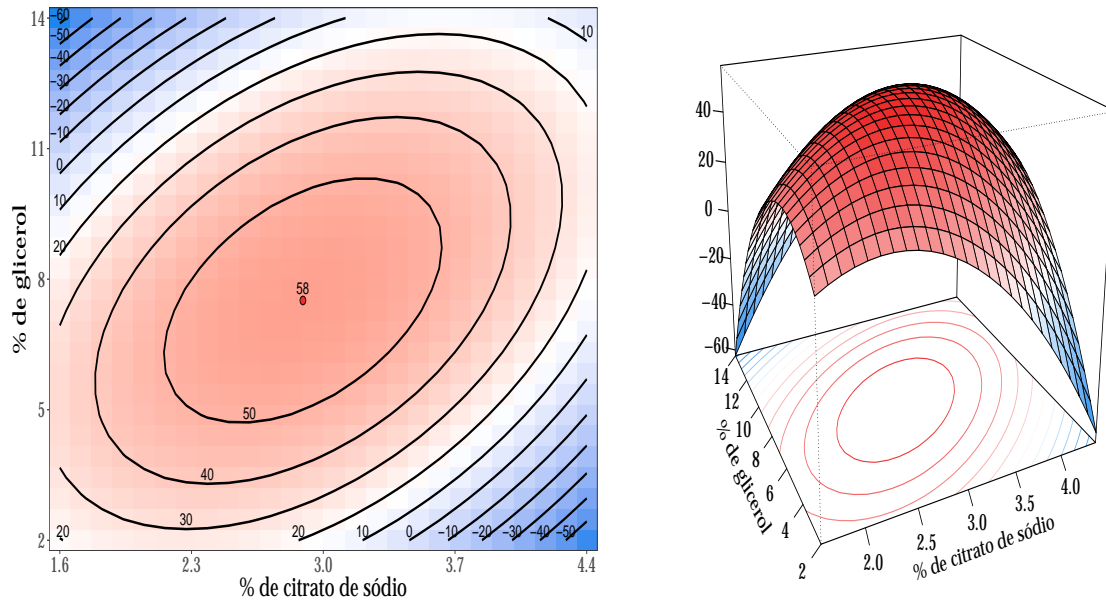


Figura 2: Gráfico de contorno e superfície de resposta estimada centrada nos pontos de máximo (2.891, 7.511)

Notamos que apesar de termos tentado vários modelos, neste cenário este é de fato o modelo mais adequado e a metodologia empregada está correta. Entretanto, nota-se uma resposta observada de 63 no ponto (0,0), que é maior do que predita (58) pelo modelo no ponto de máximo. Portanto, concluímos que apesar de ter sido um bom exercício de um cenário não trivial, faltam variáveis importantes no modelo para compor uma boa aproximação da verdadeira função que nos levaria mais assertivamente ao máximo.

Referências

- BOX, G. E. P.; DRAPER, N. R. **Response surfaces, mixtures, and ridge analyses**. 2nd. ed. John Wiley & Sons, Inc., 2007.
- BOX, G. E. P.; WILSON, K. B. On the experimental attainment of optimum conditions. **Journal of the Royal Statistical Society. Series B**, v. 13, n. 1, p. 1–45, 1951.
- CRAGLE, R. G. et al. The effects of various levels of sodium citrate, glycerol, and equilibrium time on survival of bovine spermatazoa after storage at -79°C . **Journal of Dairy Science**, v. 38, n. 5, p. 508–514, 1955.
- DEAN, A.; VOSS, D.; DRAGULJIĆ, D. **Design and Analysis of Experiments**. 2nd. ed. ChamSpringer, 2017.
- DRAPER, N. R. Center points in second-order response surface designs. **Technometrics**, v. 24, n. 2, p. 127–133, 1982.
- KHURI, A. I.; CORNELL, J. A. **Response surfaces: designs and analyses**. Marcel Dekker, Inc., 1987.
- LENTH, R. Response-Surface Methods in R, Using rsm. **Journal of Statistical Software**, v. 32, n. 7, p. 1–17, 2009.
- MONTGOMERY, D. C. **Design and Analysis of Experiments**. John Wiley & Sons, Inc., 2006.
- MYERS, R. H.; MONTGOMERY, D. C.; ANDERSON-COOK, C. M. **Response Surface Methodology**. 3rd. ed. John Wiley & Sons, Inc., 2009.

Apêndice

Apêndice A - Efeitos e significâncias do modelo completo

Tabela 1: Estimativa dos parâmetros para o modelo completo.

	Estimativa	Erro Padrão	Estatística t	P-valor
Grande Média	66.11	11.52	5.74	0.00
γ_1	-1.31	3.27	-0.40	0.70
γ_2	-2.31	3.27	-0.71	0.51
γ_3	-1.06	3.27	-0.33	0.76
γ_{12}	9.12	4.62	1.98	0.11
γ_{13}	0.62	4.62	0.14	0.90
γ_{23}	0.87	4.62	0.19	0.86
γ_{11}	-11.26	3.93	-2.87	0.04
γ_{22}	-13.64	3.93	-3.47	0.02
γ_{33}	-3.39	3.93	-0.86	0.43

Tabela 2: Teste de Falta de Ajuste para o Modelo Completo.

	GL	SQ	SQM	Estatística F	P-valor
SSE	5	853.37	170.67		
Falta de Ajuste	5	853.37	170.67		
Erro Puro	0	0.00			

Tabela 3: Testes de Soma Extras de Quadrados para Redução aos Modelos com uma covariável a menos.

	GL de Residuo	RSS	GL	SS	Estatística F	P-valor
Modelo Reduzido (12)	9.00	1007.89				
Modelo Completo	5.00	853.37	4.00	154.53	0.23	0.91
Modelo Reduzido (13)	9.00	3671.70				
Modelo Completo	5.00	853.37	4.00	2818.33	4.13	0.08
Modelo Reduzido (23)	9.00	2955.57				
Modelo Completo	5.00	853.37	4.00	2102.20	3.08	0.12

Tabela 4: Estimativa dos Parâmetros para o Reduzido com as variáveis x_1 e x_2 .

	Estimativa	Erro Padrão	Estatística t	P-valor
Grande Média	57.77	5.08	11.36	0.0001<
γ_1	-1.31	2.65	-0.50	0.6317
γ_2	-2.31	2.65	-0.87	0.4047
γ_{12}	9.12	3.74	2.44	0.0374
γ_{11}	-9.05	2.41	-3.76	0.0044
γ_{22}	-11.42	2.41	-4.75	0.0010

Tabela 5: Teste de Falta de Ajuste para o Modelo Reduzido.

	GL	SQ	SQM	Estatística F	P-valor
SSE	9	1007.89	111.99		
Falta de Ajuste	3	850.39	283.46	10.80	0.0078
Erro Puro	6	157.50	26.25		

Tabela 6: Teste de Soma Extra de Quadrados para Redução de um Modelo de Segunda ordem (interação e efeitos quadráticos) para um Modelo de Primeira Ordem).

	GL de Residuo	RSS	GL	SS	Estatística F	P-valor
Modelo Reduzido	11	4651.75				
Modelo Completo	9	1007.89	2	3643.85	16.27	0.0010

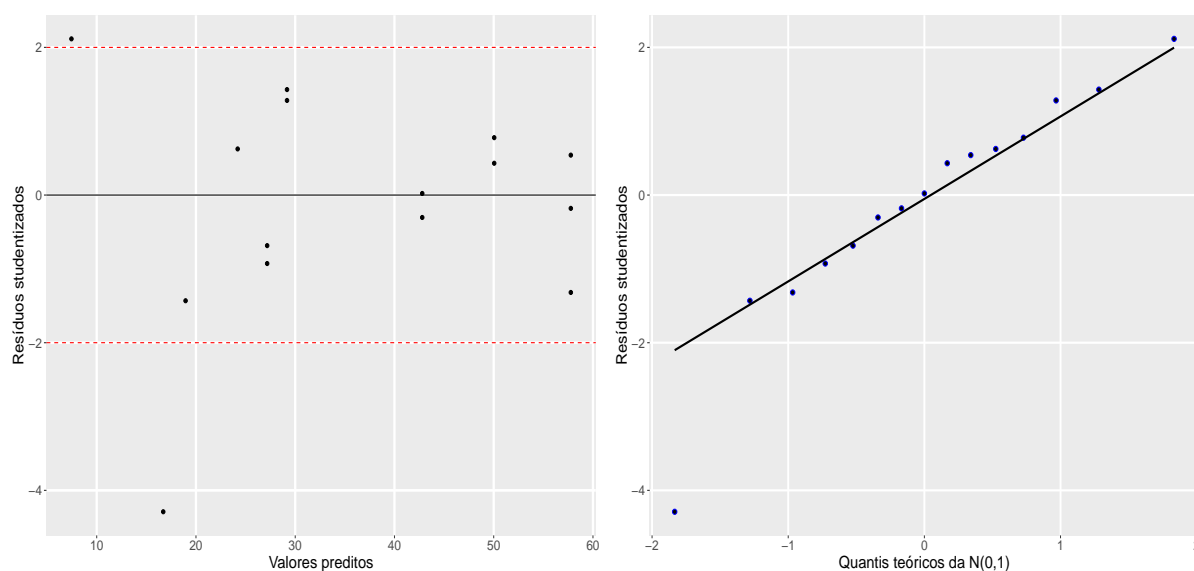


Figura 3: Comportamento dos resíduos do modelo de superfície de resposta ajustado.

Apêndice B - Direções

Tabela 7: Valores preditos para a variável resposta (\hat{y}) conforme diferentes direções.

Distância	z_1	z_2	% de sódio	% de glicerol	\hat{y}
-5.0	3.801	2.895	5.661	16.685	-79.964
-4.5	3.406	2.589	5.384	15.767	-53.756
-4.0	3.010	2.283	5.107	14.849	-30.270
-3.5	2.614	1.978	4.830	13.934	-9.573
-3.0	2.219	1.672	4.553	13.016	8.359
-2.5	1.823	1.366	4.276	12.098	23.556
-2.0	1.428	1.060	4.000	11.180	35.970
-1.5	1.032	0.754	3.722	10.262	45.641
-1.0	0.636	0.449	3.445	9.347	52.539
-0.5	0.241	0.143	3.169	8.429	56.678
0.0	-0.155	-0.163	2.892	7.511	58.059
0.5	-0.550	-0.469	2.615	6.593	56.680
1.0	-0.946	-0.775	2.338	5.675	52.535
1.5	-1.341	-1.080	2.061	4.760	45.647
2.0	-1.737	-1.386	1.784	3.842	35.979
2.5	-2.133	-1.692	1.507	2.924	23.545
3.0	-2.528	-1.998	1.230	2.006	8.372
3.5	-2.924	-2.304	0.953	1.088	-9.588
4.0	-3.319	-2.609	0.677	0.173	-30.252
4.5	-3.715	-2.915	0.400	-0.745	-53.736
5.0	-4.111	-3.221	0.122	-1.663	-79.986

Apêndice C - Códigos

Os seguintes comandos da biblioteca **rsm** criaram o delineamento empregado no estudo.

```
library(rsm)
created_ccd <- djoin(
  cube(3,
    n0 = 1,
    coding = list(
      x1 ~ (sodium_citrate_pct - 3)/0.7,
      x2 ~ (glycerol - 8)/3,
      x3 ~ (hours_before_freezing - 16)/6)
    ),
  star(n0 = 1, alpha = 2))
```

Tabela 8: Delineamento experimental utilizado.

run.order	std.order	z_1	z_2	z_3
1	8	1	1	1
2	6	1	-1	1
3	4	1	1	-1
4	7	-1	1	1
5	3	-1	1	-1
6	1	-1	-1	-1
7	9	0	0	0
8	5	-1	-1	1
9	2	1	-1	-1
1	4	0	2	0
2	2	2	0	0
3	1	-2	0	0
4	5	0	0	-2
5	6	0	0	2
6	7	0	0	0
7	3	0	-2	0

Os códigos a seguir realizam a leitura dos dados e codificação dos fatores.

```
library(rsm)

motile_surv <- read.csv("tabula-teste.csv")
motile_surv_coded <- as.coded.data(motile_surv,
                                   x1 ~ (sodium_citrate_pct - 3)/0.7,
                                   x2 ~ (glycerol - 8)/3,
                                   x3 ~ (hours_before_freezing - 16)/6)
```

Para o ajuste e seleção dos modelos utilizou-se os seguintes comandos.

```
fo_model <- rsm(y ~ FO(x1,x2,x3),data = motile_surv_coded)
summary(fo_model)

so_model_full <- rsm(y ~ SO(x1,x2,x3),data = motile_surv_coded)
summary(so_model_full)

so_model_x1_x2 <- rsm(y ~ SO(x1,x2),data = motile_surv_coded)
summary(so_model_x1_x2)

so_model_x1_x3 <- rsm(y ~ SO(x1,x3),data = motile_surv_coded)
summary(so_model_x1_x3)

so_model_x2_x3 <- rsm(y ~ SO(x2,x3),data = motile_surv_coded)
summary(so_model_x2_x3)

anova(so_model_x1_x2,so_model_full)
anova(so_model_x1_x3,so_model_full)
anova(so_model_x2_x3,so_model_full)
```

Os seguinte códigos foram utilizados para a análise canônica e análise *ridge*.

```
canonical(so_model_x1_x2)
canonical.path(so_model_x1_x2)
contour(so_model_x1_x2, ~ x1 + x2, image = TRUE,
        at = summary(so_model_x1_x2)$canonical$xs)
```